



TITLE:

超電導体中の共鳴散乱に因る束縛状態

AUTHOR(S):

町田, 一成; 柴田, 文明

CITATION:

町田, 一成 ...[et al]. 超電導体中の共鳴散乱に因る束縛状態. 物性研究
1972, 17(5): 349-359

ISSUE DATE:

1972-02-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/88404>

RIGHT:

超電導体中の共鳴散乱に因る束縛状態

東教大理 町田一成, 柴田文明

(1月19日受理)

§ 1. 序

Abrikosov — Gorkov¹⁾が所謂 Gapless superconductor が, 磁性不純物の存在する系に於いて起こることを発見して以来 Gapless の状況が起るいくつかの機構が明らかになった。Maki²⁾によると以下の如くに分類される:

1) 磁場中, 2) spin 交換相互作用, 3) 磁性不純物, 4) 高磁場中の第Ⅱ種超電導体 5) metallic contact.

上の分類を Gap 内に束縛状態が出来るか否かで, 二様に別けることも出来る。例えば磁性不純物を含む系で, Abrikosov — Gorkov が扱った Born 近似では, 束縛状態は Gap 内に出ないが一方, Shiba³⁾の Classical spin の取扱いは, 出る。

この論文で我々は Gap 内に束縛状態が出るそして, 不純物の濃度を増加せるとついに Gapless superconductor に導くような簡単なモデルを示す。その機構は局在不純物に因る共鳴散乱⁴⁾によって引き起されるものである。

§ 2. 不純物一個の問題

我々の考えるモデルは, 伝導電子系と局在電子が超電導体中で mixing interaction を通じて相互作用している系である。

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k}\sigma} V_{\mathbf{k}d} (c_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} + d_{\sigma}^{\dagger} c_{\mathbf{k}\sigma}) \\ & + E \sum_{\sigma} n_{d\sigma} \\ & - \Delta \sum_{\mathbf{k}} (c_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} c_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} + c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow}) \end{aligned} \quad (2.1)$$

ここで $C_{\mathbf{k}\sigma}$ ($C_{\mathbf{k}\sigma}^+$) と d_{σ} (d_{σ}^+) は各々伝導電子と局在電子の消滅 (生成) 演算子である。 Δ は超電導状態を記述する order parameter であり以下の式で self-consistent に決められるべき量である。

$$\Delta = |g| \sum_{\mathbf{k}} \langle C_{\mathbf{k}\uparrow}^+ C_{-\mathbf{k}\downarrow}^+ \rangle \quad (2.2)$$

$|g|$ は Cooper pair の pairing の強さを表わす。

問題を以下の如くに Nambu 空間で取扱うと便利である。今二時間グリーン函数を定義する；

$$G_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}(\omega) = \begin{pmatrix} \langle\langle C_{\mathbf{k}\uparrow}; C_{\mathbf{k}'\uparrow}^+ \rangle\rangle & \langle\langle C_{\mathbf{k}\uparrow}; C_{-\mathbf{k}'\downarrow} \rangle\rangle \\ \langle\langle C_{-\mathbf{k}\downarrow}^+; C_{\mathbf{k}'\uparrow}^+ \rangle\rangle & \langle\langle C_{-\mathbf{k}\downarrow}^+; C_{-\mathbf{k}'\downarrow} \rangle\rangle \end{pmatrix} \quad (2.3)$$

(2.1) の Hamiltonian は (2.3) のグリーン函数を用いて容易に解くことができる, 結果は,

$$G_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}(\omega) = \frac{1}{2\pi} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} G_{\mathbf{k}}^0(\omega) + \frac{1}{2\pi} G_{\mathbf{k}}^0(\omega) t(\omega) G_{\mathbf{k}'}^0(\omega) \quad (2.4)$$

ここで

$$G_{\mathbf{k}}^0(\omega) = (\omega - \epsilon_{\mathbf{k}} \tau_3 + \Delta \tau_1)^{-1} \quad (2.5)$$

$$t(\omega) = V_{\mathbf{k}\mathbf{d}}^2 \tau_3 (\omega - E \tau_3 - V_{\mathbf{k}\mathbf{d}}^2 \tau_3 F(\omega) \tau_3)^{-1} \tau_3 \quad (2.6)$$

$$F(\omega) = \sum_{\mathbf{k}} G_{\mathbf{k}}^0(\omega) \quad (2.7)$$

$|\omega| < \Delta$ に対しては具体的に

$$V_{\mathbf{k}\mathbf{d}}^2 F(\omega) = -\Gamma \frac{\omega - \Delta \tau_1}{\sqrt{\Delta^2 - \omega^2}} \quad (2.8)$$

$$\Gamma \equiv \pi \rho V_{\mathbf{k}\mathbf{d}}^2 \quad (2.9)$$

ρ はフェルミ面での状態密度であり, τ_i は Pauli matrix である。

束縛状態は t -matrix (2.6) の pole として与えられる, 即ち pole を決

める式は；

$$\omega^2 \left(1 + \frac{2\Gamma}{\sqrt{\Delta^2 - \omega^2}} \right) = E^2 + \Gamma^2 \quad (2.10)$$

(2.10)の解の様子を図1に示した。

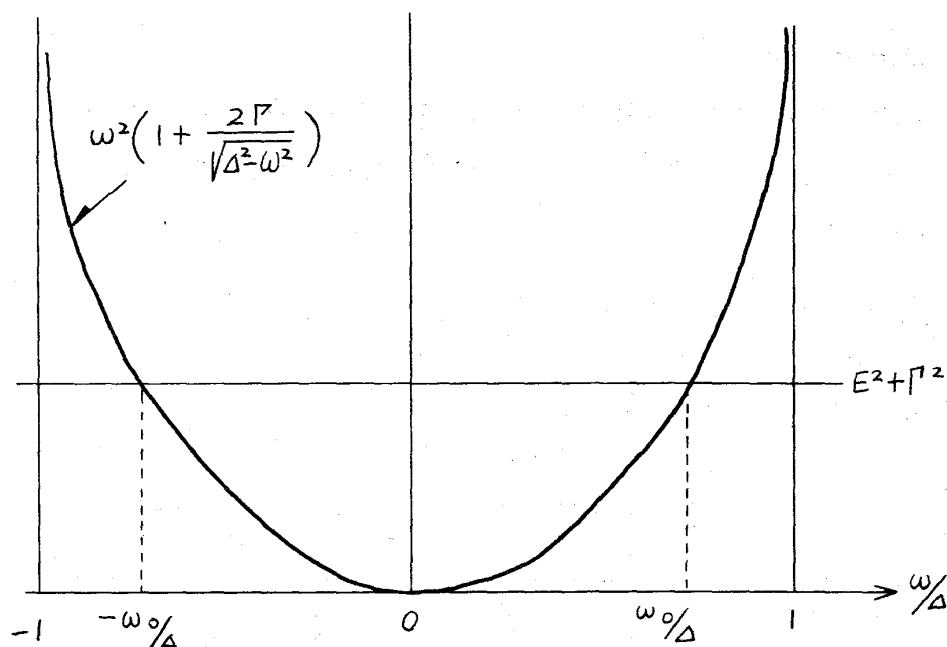


図1 (2.10)の束縛状態の位置を決める式の図， $\omega = \pm\omega_0$ に束縛状態が生じていることを示している。

図1から明らかなように E と Γ に無関係に常に解が存在する，即ち，常にGap内に束縛状態が存る。

次に転移温度 T_c の変化を考えよう。不純物濃度 c が小さく，その一次までの表式がほしい時は，(2.6)の t -matrix を単に c 倍したものを用いて計算すればよい。結果は

$$\ln \frac{T_{c0}}{T_{c0}} = c \frac{\Gamma}{\rho} Q \quad (2.11)$$

ここで T_{c0} は不純物の無い B.C.S. 超電導体の転移温度であり， Q は次式で定義される。

$$Q = T_c \sum_n \frac{1}{|\omega_n| \{ (|\omega_n| + \Gamma^2) + E^2 \}} \quad (2.12)$$

この表式は Hatree - Fock 近似での Anderson モデルの計算⁵⁾で $c \ll 1$, $U \rightarrow 0$ としたものと一致する。

§ 3. 状態密度の様子

この節は前に得られた解を基にして Gap 内外の状態密度の様子を調べてみる。その為にはまず d 電子のグリーン関数 $G_d(\omega)$ を求めておこう。これは (2.4) から容易に次の如に見出される；

$$G_d(\omega) = (\omega - E\tau_3 - V_{\mathbf{k}\sigma}^2 \tau_3 F(\omega) \tau_3)^{-1} \quad (3.1)$$

具体的に $|\omega| < \Delta$ に対して

$$G_d(\omega) = \frac{\omega \left(1 + \frac{\Gamma}{\sqrt{\Delta^2 - \omega^2}} \right) + E\tau_3 - \frac{\Gamma \cdot \Delta}{\sqrt{\Delta^2 - \omega^2}} \tau_1}{\omega^2 \left(1 + \frac{2\Gamma}{\sqrt{\Delta^2 - \omega^2}} \right) - E^2 - \Gamma^2} \quad (3.2)$$

と書き直すことが出来る。(3.2)を使って Gap内の d 電子の寄与による状態密度 $N_d(\omega)$ は系のスピン対称性を考慮すると

$$\begin{aligned} N_d(\omega) = & \frac{1 + \frac{\Gamma}{\sqrt{\Delta^2 - \omega_0^2}} + \frac{E}{\omega_0}}{1 + \frac{2\Gamma}{\sqrt{\Delta^2 - \omega_0^2}} + \frac{\Gamma \omega_0^2}{(\Delta^2 - \omega_0^2)^{3/2}}} \delta(\omega - \omega_0) \\ & + \frac{1 + \frac{\Gamma}{\sqrt{\Delta^2 - \omega_0^2}} - \frac{\omega_0}{E}}{1 + \frac{2\Gamma}{\sqrt{\Delta^2 - \omega_0^2}} + \frac{\Gamma \omega_0^2}{(\Delta^2 - \omega_0^2)^{3/2}}} \delta(\omega + \omega_0) \quad (3.3) \end{aligned}$$

ここで ω_0 は (2.10) の解である。

これは Gap 内 $\omega = \pm \omega_0$ に δ 関数型の状態密度が存在していることを示している。全く同様にして伝導電子の Gap 内状態密度 $N_c(\omega)$ も (2.4) で与えられるグリーン関数を用いて容易に計算することができる。結果を示すと

$$N_c(\omega) = \frac{\Gamma \Delta^2}{(\Delta^2 - \omega_0^2)^{3/2}} \cdot \frac{1}{1 + \frac{2\Gamma}{\sqrt{\Delta^2 - \omega_0^2}} + \frac{\Gamma \omega_0^2}{(\Delta^2 - \omega_0^2)^{3/2}}} \times \{ \delta(\omega - \omega_0) + \delta(\omega + \omega_0) \} \quad (3.4)$$

したがって全 Gap 内状態密度 $N(\omega)$ は

$$N(\omega) = N_d(\omega) + N_c(\omega) \\ = (1 + \alpha) \delta(\omega - \omega_0) + (1 - \alpha) \delta(\omega + \omega_0) \quad (3.5)$$

ここで

$$\alpha \equiv \frac{E/\omega_0}{1 + \frac{2\Gamma}{\sqrt{\Delta^2 - \omega_0^2}} + \frac{\Gamma \omega_0^2}{(\Delta^2 - \omega_0^2)^{3/2}}} \quad (3.6)$$

結局, energy - Gap 内各々 $\omega = \omega_0$ に, weight $(1 + \alpha)$, $\omega = -\omega_0$ に weight $(1 - \alpha)$ で δ 関数型の準位が出来ていることが判った。又, energy - Gap 内で状態密度を積分すると 常数 2 になることもわかった。

全く同様の計算を Gap の外側: $|\omega| > \Delta$ についても行くと, まず, d 電子からの状態密度 $N_d(\omega)$ は,

$$N_d(\omega) = \frac{2}{\pi} \cdot \frac{\Gamma \omega}{\sqrt{\omega^2 - \Delta^2}} \cdot \frac{(\omega + E)^2 + \Gamma^2}{\{(\omega - E)^2 + \Gamma^2\} \{(\omega + E)^2 + \Gamma^2\} + 4\Gamma^2 \Delta^2 \left(\frac{\omega}{\omega^2 - \Delta^2} \right)^2} \quad (3.7)$$

で与えられることがわかる。

以上の計算をまとめて図にしたのが下の図 2 である。

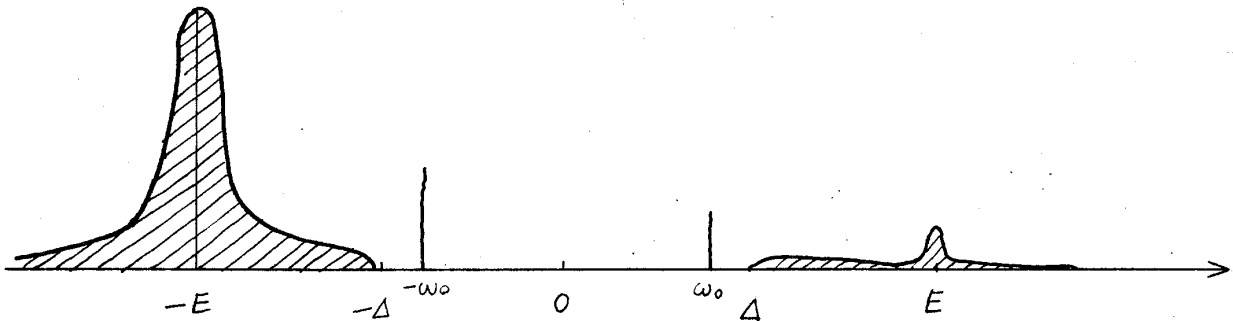


図 2 $|\omega| > \Delta$ に於ける d 電子の状態密度と $|\omega| < \Delta$ に於ける束縛状態の様子

即ち, Gap内に, particle-holeに対応して二つの bound stateがあり, $\omega = \pm E$ に d 電子の状態密度にピークが現われる。又 Gapの端では $N_d(\omega) \sim (\omega^2 - \Delta^2)^{1/2}$ で消える。

更に言うならば, $E \rightarrow 0$ で図 2は $\omega = 0$ に関して対称になる, 即ち particle-hole 対称性を回復する。これは (2.1)の Hamiltonianが, $E \rightarrow 0$ で particle-hole対称性を持っていることの反映である。

§ 4. 不純物濃度が有限である時の問題

この節では, 一個問題を拡張して有限濃度の問題を考えてみよう。但し, これは Normal 系でさえ困難な事であるので, ここでは一番単純な近似を採用して議論をすることにする。即ち self-energy part $\Sigma(\omega)$ はくり込まれた t-matrix と次の様な関係で結ばれているとする:

$$\Sigma(\omega) = c \bar{t}(\omega) \quad (4.1)$$

ここで

$$\bar{t}(\omega) = (\omega - E\tau_3 - V_{\mathbf{k}d}^2 \tau_3 \bar{F}(\omega) \tau_3)^{-1} \quad (4.2)$$

$$\bar{F}(\omega) = \sum_{\mathbf{k}} \bar{G}_{\mathbf{k}\mathbf{k}}(\omega) \quad (4.3)$$

c は不純物濃度である。

更に $\bar{G}_{\mathbf{k}\mathbf{k}}(\omega)$ は $\Sigma(\omega)$ を含んでいるので結局 $\bar{G}_{\mathbf{k}\mathbf{k}}(\omega)$ と $\Sigma(\omega)$ とを self-consistent に決めねばならぬ。そのために

$$\bar{G}_{\mathbf{k}\mathbf{k}}(\omega) = (\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}}\tau_3 + \Delta\tau_1 - \Sigma(\omega))^{-1} = (\tilde{\omega} - \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}}\tau_3 + \tilde{\Delta}\tau_1)^{-1} \quad (4.4)$$

とおく。そして $\tilde{\omega}$, $\tilde{\Delta}$ に対する self-consistent 方程式を立てると

$$\begin{aligned} \tilde{\omega} &= \omega - cV_{\mathbf{k}\mathbf{d}}^2 \left(\omega + \frac{\tilde{\omega}\Gamma}{\sqrt{\tilde{\Delta}^2 - \tilde{\omega}^2}} \right) \left\{ \omega^2 + \frac{2\Gamma\omega\tilde{\omega}}{\sqrt{\tilde{\Delta}^2 - \tilde{\omega}^2}} - (E^2 + \Gamma^2) \right\}^{-1} \\ \tilde{\Delta} &= \Delta - cV_{\mathbf{k}\mathbf{d}}^2 \cdot \frac{\tilde{\Delta}\Gamma}{\sqrt{\tilde{\Delta}^2 - \tilde{\omega}^2}} \left\{ \omega^2 + \frac{2\Gamma\omega\tilde{\omega}}{\sqrt{\tilde{\Delta}^2 - \tilde{\omega}^2}} - (E^2 + \Gamma^2) \right\}^{-1} \end{aligned} \quad (4.5)$$

今補助的なパラメタ $u(\equiv \tilde{\omega} / \tilde{\Delta})$, $v(\equiv \omega / \Delta)$ を導入し, (4.5) を書き直すと,

$$v = u + \zeta \frac{v}{v^2 + 2\bar{\Gamma} \frac{uv}{\sqrt{1-u^2}} - \bar{\varepsilon}^2} \quad (4.6)$$

ここで

$$\zeta = \frac{1}{\Delta \cdot \tau} = \frac{c}{\Delta^2} V_{\mathbf{k}\mathbf{d}}^2$$

$$\bar{\Gamma} = \Gamma / \Delta$$

$$\bar{\varepsilon}^2 = (E / \Delta)^2 + (\Gamma / \Delta)^2$$

(4.6) を解析的に解くのは難しいので $c \ll 1$, or $\zeta \ll 1$ に限定して iteration で解こう, 0 次 iteration では

$$v = u$$

1 次の iteration では,

$$v = u \left(1 + \zeta \frac{1}{u^2 + 2\bar{\Gamma} \frac{u^2}{\sqrt{1-u^2}} - \bar{\varepsilon}^2} \right) \quad (4.7)$$

となる。以下では(4.7)を解析して、状態密度を定性的に調べる。今(4.7)の右辺の関数を $\varphi(u)$ と定義する：

$$\varphi(u) = u + \zeta \frac{u}{u^2 + 2\bar{\Gamma} \frac{u^2}{\sqrt{1-u^2}} - \bar{\varepsilon}^2} \quad (4.8)$$

そして $\varphi(u)$ の変化を調べて図示したのが図3、図4である。

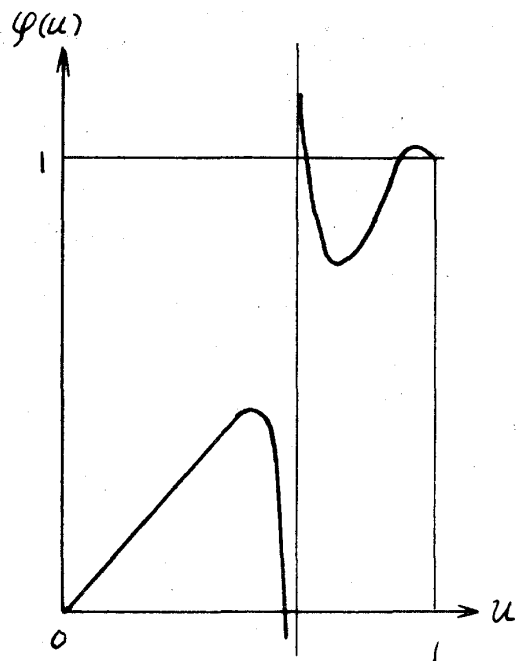


図3. ζ が非常に小さい時の函数 $\varphi(u)$ の様子

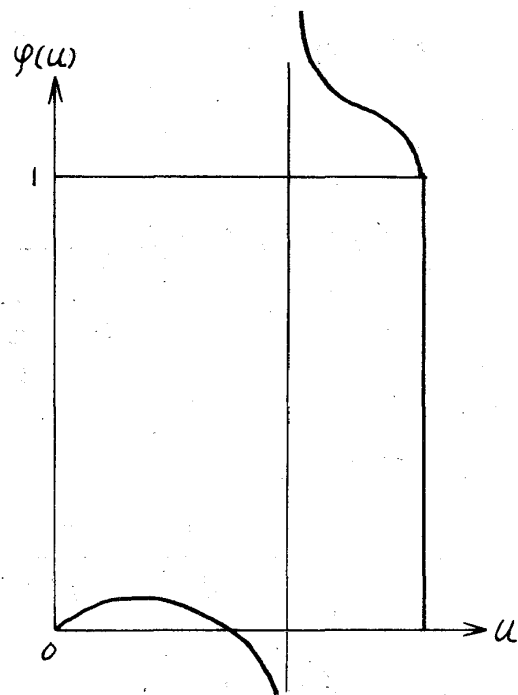


図4. ζ が比較的大きい時の $\varphi(u)$ の様子

この函数の定性的振舞は Shiba⁽²⁾ の Classical spin の計算で出て来た函数と同じである。図3、図4から以下で定義された状態密度 $N_s(\omega)$ を得るのは容易である。

$$N_S(\omega) = \rho \mathcal{I}m \frac{u}{\sqrt{1-u^2}} \quad (4.9)$$

$N_S(\omega)$ の様子を図 5 に示した

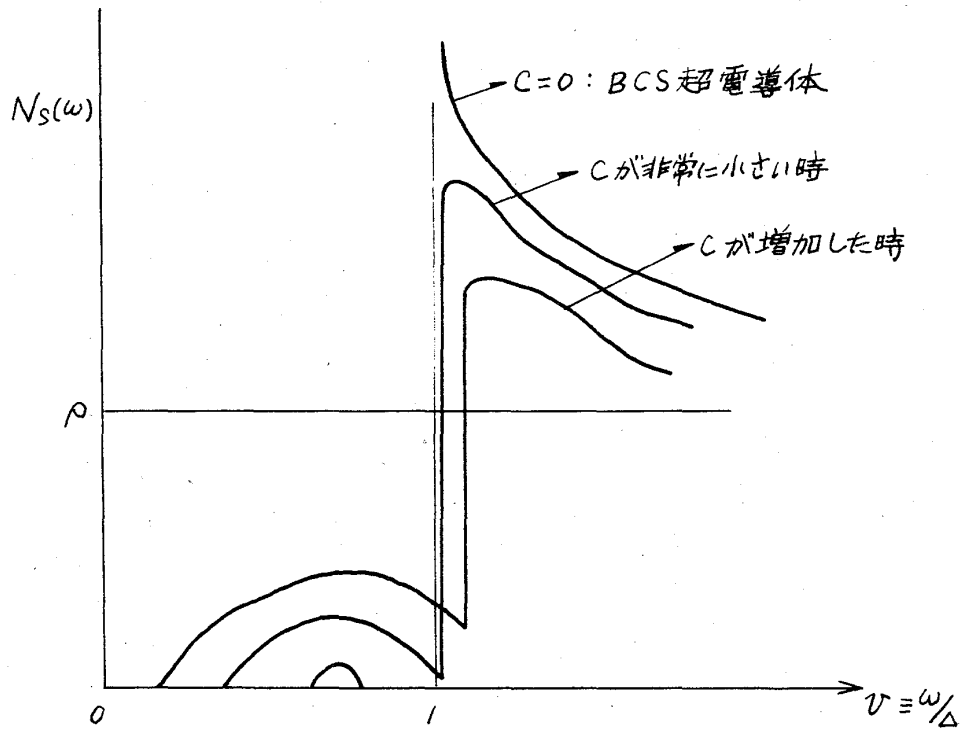


図 5. 状態密度の不純物濃度を変化させた時の様子

次に不純物濃度 c が増加した時 (4.6) をもつと正しく解析せねばならぬ, そこで (4.6) を数値解析しその結果を図 6. 図 7 に示した。

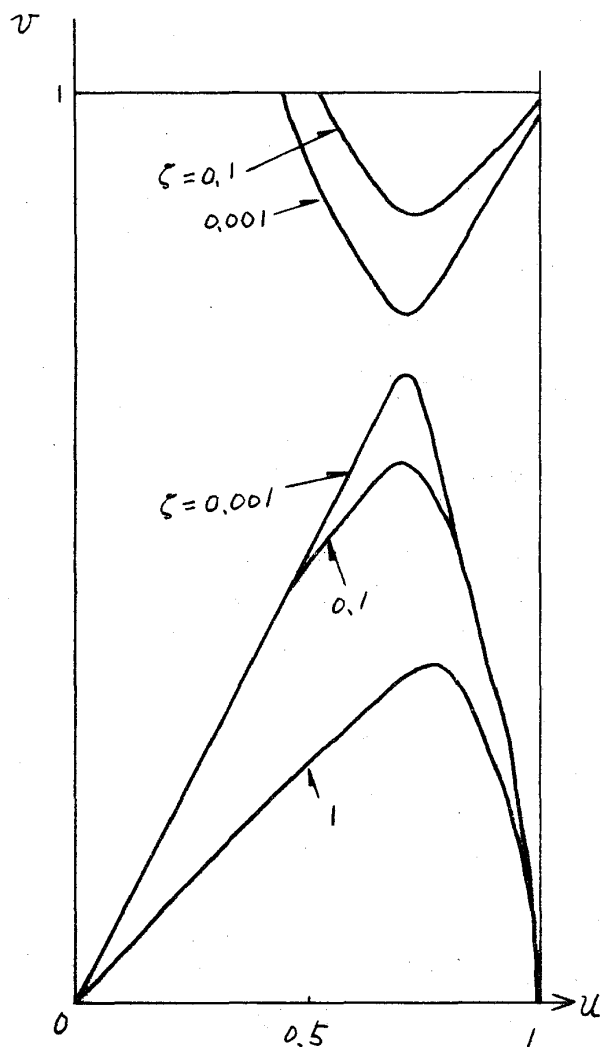


図 6. (4.6)の数値計算の結果
(但し, $\bar{\epsilon}^2=2, \bar{f}=1$ とした)

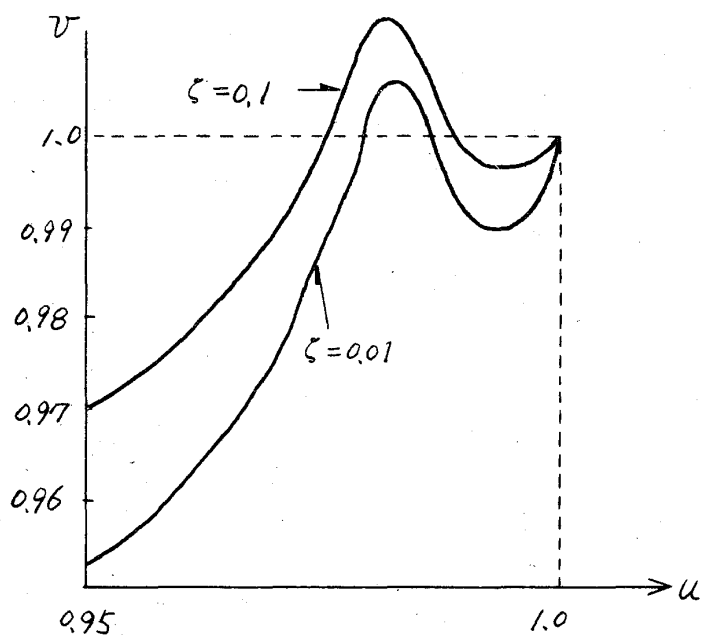


図 7. 図 6 の $u=1, u=1$ 近傍を拡大したものの

しかし図 6, 図 7 から得られる状態密度 $N_S(\omega)$ は本質的に図 5 に描いたものに帰着する。

以上まとめると, 不純物が一個の時は, Gap の中に bound state が生じ, 不純物濃度を増加させると bound state が成長して band を型成すると同時に Gap 端は連続帯の方へおしやられる。更に不純物濃度を増加させるとついには Gap を "impurity band" がうめてしまい所謂 Gapless superconductor が実現する。

§ 5. 結論

超電導体への共鳴散乱の影響を調べた。その結論をまとめると、

a) 一個の " non - magnetic " な不純物は energy gap 内に、系の energy パラメタ (E, Γ) に無関係に bound state を生じさせる。転移温度 T_c の減少は大きくはない。

b) 不純物濃度が有限になると energy - gap 内の impurity band は成長し、ついには Gapless superconductor になる。

最後に種々御指導下さった高野文彦先生と特に第三節の議論を教えて下さった石井力さんに感謝致します。

References

- 1) A.A. Abrikosov and L.P. Gorkov, Soviet Phys. JETP 12 (1961) 1243
- 2) K. Maki, in " Superconductivity ", edited by R.D. Parks, Marcel Dekker, Inc., 1969
- 3) H. Shiba, Prog. Theor. Phys. 40 (1969) 435
- 4) K. Takanaka, and F. Takano, Prog. Theor. Phys. 36 (1966) 1080